4.金属中の重い粒子の拡散(金属中の荷電粒子の運動,研究会報告)

近藤, 淳

2) E. Yagi, G. Flik, K. Fürderer, N. Haas, D. Herlach, J. Major, A. Seeger, W. Jacobs, M. Krause, M. Krauth, H.-J. Mundinger and H. Orth, Phys. Rev. **B30**, (1984) 441.

3) R. I. Grynszpan, N. Nishida, K. Nagamine, R. S. Hayano, T. Yamazaki, J. H. Brewer and D. G. Fleming, Solid State Comm., **29**, (1979) 143.

4) A. Yaonanc, J. F. Dufresne, R. Langobardi, J. P. Pezetti, J. Chappert, O. Hartmann, E. Karlsson and L. O. Norlin, J. Phys. F., **9** (1979) 2157.

5) H. Graf, G. Balzer, E. Recknagel, A. Weidinger and R. I. Grynszpan, Phys. Rev. Lett., **44**, (1980) 1333.

6) A. Seeger, in *Hydrogen in Metals I,* ed. G. Alefeld and J. Völkl (Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1978), p. 349.

4. 金属中の重い粒子の拡散

電総研　近　藤　　淳

金属中を動く粒子と伝導電子との相互作用が粒子の運動にどのような影響を及ぼすかという問題を考える。特に金属電子に附随した赤外発散がどのような効果を持つかという点に重点を起き，その結果を銅中の正ミュオンの拡散係数の実験結果と比較する。

一般論として，粒子の質量が電子質量より十分大きいと考え，断熱近似を適用してみる。まず粒子を固定し，電子系の波動関数を定める。粒子が電子に及ぼすポテンシャル・エネルギーを V_R とし，電子の運動エネルギーを H_0 として

$$(H_0 + V_R)\Phi_R = E_0\Phi_R$$

によって電子系の波動関数 Φ_R を定める。R は粒子の座標である。E_0 は断熱ポテンシャルに相当するが今の場合 R によらないとする。断熱近似では全系の波動関数を

$$\Psi = \Phi_R \cdot \psi(R) \tag{1}$$

のようにおき，粒子の波動関数 $\psi(R)$ を，粒子の感じる周期ポテンシャル $U(R)$ 及び断熱ポテンシャルの中で解く。(1) は粒子と電子の相互作用を最も得する形になっている。ψ も $U(R)$ の中で解かれたのであれば (1) のエネルギーは申分ないものになっていると思われるかも知れない。しかし (1) を用いて全エネルギーの平均を求めると，粒子の運動エネルギーを Φ_R に作用したものが生じる。つまり

$$<\Phi_R|\Delta_R|\Phi_R>$$

という平均を求めなくてはならない。Δ_R は R についてのラプラシアンである。これを

$$\Delta_R <\Phi_{R'}|\Phi_R>|_{R=R'}$$

と書直すと結局二つのスレーター行列式の重なり積分が出てくる。これはアンダーソンの直交定理によって $R\neq R'$ では0となり $R=R'$ では1である。その微分であるから上式は発散してしまう。つまり(1)のように電子が絶えず粒子を追かけながら，完全な波動関数（粒子・電子相互作用を最も得する形をした波動関数）を保つことは出来ないことを意味する。これは電子の運動が，断熱近似が成立つ程十分速くはないことを意味しており，それはフェルミ面近傍で電子・正孔対を発生する低エネルギー励起が沢山あることに起因している。

このような発散を含まない波動関数を考えるのに2つの方法がある。まず(1)で考慮の外にあったのは粒子に電子が衝突した時の反跳である。Φ_R を摂動展開した時に分母に電子・正孔対のエネルギーがくるが，そこに粒子の反跳エネルギーを含ませるという形で反跳の効果をとりこむことが出来る。このようにすると上述の赤外発散は反跳エネルギーで押えられる。このようにした時のエネルギーの全損失は

$$gT_0 \ln (D/T_0) \tag{2}$$

の程度であることが判る。g は無次元粒子・電子相互作用，T_0 は粒子の反跳エネルギー（$\sim\hbar^2k_F^2/M$, M：粒子質量），D は電子のバンド巾。これは修正された断熱近似であって，$U(R)$ が比較的なだらかな時に成立つ。もう一つの方法は $U(R)$ が深い井戸の周期配列の場合などに適用される。この時は一つの井戸の中で粒子は速く廻っているから，それを電子が追随することは損になり，電子の波動関数は井戸の中心に固定したものになる。正確にいえば，粒子から平均のポテンシャル（粒子の波動関数で平均した）を受けた時の波動関数となる。このとき(2)の損失は存在しないが，相互作用を平均としてしか考慮しないことから損失が生じる。井戸の中での局在化が十分よければこちらの方が得になる。その目安は

$$k_F^2 b^2 \ll \frac{m}{M} \ln \frac{M}{m} \tag{3}$$

が成立つことである。m/M は質量の比で，b は井戸中の波動関数の拡がりである。ミュオンなら $k_F b \ll 0.16$ であるが，銅中の正ミュオンに対してほぼ満されていると期待してよいのではないかと思われる。

この第2の場合が成立っているとき，$\psi(R)$ が tight-binding で表わされるとしよう。そうする

と全波動関数Ψは

$$\Psi=\sum_n \mathrm{e}^{iq\cdot R_n}\phi(R-R_n)\cdot \Phi_{R_n} \tag{4}$$

と表わすことが出来る。$\phi(R-R_n)$はn番目の井戸に局在した波動関数で，R_nは井戸の中心座標，Φ_{R_n}は上でいった意味でR_nを中心とする電子の波動関数である。Φ_{R_n}をΦ_Rでおきかえると(1)になることに注意。

このように(4)は非断熱効果のはいった波動関数であるが，それの導く重要な結論の一つは，粒子のトンネルのマトリクス要素がΦ_{R_n}の重なり積分でrenormalizeされることである。R_1からR_2へのトンネルの際に

$$<\phi(R-R_1)\,|H|\,\phi(R-R_2)>\cdot<\Phi_{R_1}\,|\,\Phi_{R_2}> \tag{5}$$

のように第2因子が本来のトランスファー積分に掛かる。これはすでにのべたように絶対零度では0であるが，有限温度では$(T/D)^K$のように温度のベキになる。Kは

$$K=g\left(1-\frac{\sin^2 k_{\mathrm{F}}|R_1-R_2|}{k_{\mathrm{F}}^2|R_1-R_2|^2}\right) \tag{6}$$

のように，井戸間の距離を含む相互作用常数である。この因子は例えば$T=1K$では非常に小さいから，粒子のトランスファーを非常に小さくし，また温度のベキに比例する効果を与える。

次にこのような効果がミュオンの拡散係数にどのような結果を与えるかを計算しよう。そのため，上の断熱効果をとりいれた全系のハミルトニアンを書いてみる。

$$H=H_0+\Delta\sum_{n\ell}(c_n^\dagger c_{n+\ell}+c_{n+\ell}^\dagger c_n)+\sum_n c_n^\dagger c_n V_{R_n}. \tag{7}$$

第2項はミュオンのトンネルのエネルギーであり，第3項はミュオンがn番目の井戸にいるとき，電子は井戸の中心にポテンシャルの中心があるように感ずることを表わしている。これをもとにしてミュオンの拡散係数を計算する。その際，ミュオンは第2項によってかなりの距離をコヒレントに走り，時々第3項で散乱されるという考え方と，ミュオンをある位置に固定させて，第1項と第3項の固有状態を考え，それが第2項によって移動するという考え方と2通りある。

まず第一の考え方で計算する。そのためHをフーリエ変換し

$$H=\sum\varepsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}+\sum E_q c_q^\dagger c_q+V_0\sum a_{k'\sigma}^\dagger a_{k\sigma}c_{q+k-k'}^\dagger c_q \tag{8}$$

を得る。c_qがコヒレントなミュオンの演算子で，$a_{k\sigma}$は電子の演算子である。このハミルトニアンのどこに非断熱効果が含まれているかというと，それはE_qの中にである。E_qはtightbindingのエネルギースペクトルである。もしこれが g^2（自由粒子）であると先程のべたような効果（質量のシフト）は起らない。さて c_q が第3項で散乱される確率を計算する。粒子のバンド巾 $\varDelta$ が T に較べて小さいと，relaxation rateはコリンハの式によって与えられる： $\Gamma=\pi g T$.（$g=2V_0^2\rho^2$， ρ：状態密度）しかしこれは V_0 について最低次であって，高次の vertex correctionをいれると

$$\Gamma=\pi g T\cdot(D/T)^{2g} \qquad T\gg\varDelta \tag{9}$$

となる。第2の因子の値は非常に大きい。このため平均自由行程と格子間距離との比は

$$\frac{l}{a}\sim\frac{\varDelta}{\pi g T}\left(\frac{T}{D}\right)^{2g} \tag{10}$$

となり，通常1より十分小さくなってしまう。つまり出発点の仮定が成立たない。

そこで第2の考え方で計算する。 $t=0$ でミュオンは R_1 にあったとする。その時電子の感じるハミルトニアンは $H_1\equiv H_0+V_{R_1}$ である。$\varDelta$ の作用によって t 秒後にミュオンを R_2 に見出す確率は，適当な t の値のとき t に比例し，比例係数 W は $\varDelta^2$ のオーダーで

$$\begin{aligned} W&=\varDelta^2\int_{-\infty}^{\infty}R(t)\,\mathrm{d}t \\ R(t)&=\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_1 t}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_2 t}\rangle_1 \end{aligned} \tag{11}$$

と表わされる。ここで $H_2\equiv H_0+V_{R_2}$. $\langle\,\rangle_1$ は H_1 についての熱平均を表わす。$R(t)$ は V_0 で展開すると $\ln T$ や $\ln t$ や t などの項が生じる。それらのうち発散の最も強い項を集めると

$$R(t)=\left(\frac{\pi T}{D}\right)^{2K}\cdot\left(\frac{1}{\sinh\pi T t}\right)^{2K}\cdot\mathrm{e}^{-\pi\mathrm{i}K\,\mathrm{sgn}(t)} \qquad (t\gg D^{-1})$$

が得られる。第1の因子は(5)の第2因子にほかならない。 dissipationを表わすもので，これを $\sim\mathrm{e}^{-2\pi KTt}\cdot 2^{2K}$ と書いてみると，πKT はレベルのぼけを表わしているとみることが出来る。ミュオンが R_1 から R_2 へとぶときに，R_2 のレベルは R_1 のレベルに対して一般にずれているであろう（電子・ミュオン相互作用により）。そのずれの程度が πKT であると考えられる。(11)の積分を行うと，K が小さいとき

$$W=\left[\varDelta\left(\frac{\pi T}{D}\right)^{K}\right]^2\cdot\frac{1}{\pi KT}$$

が得られる。これはrenormalizeされたトンネルの行列要素によって，状態密度（πKT）$^{-1}$ の終状態へ遷移する時の transition rateと考えることが出来る。W は T^{2K-1} に比例するが $K\sim 0.3$ ととると，東大中間子グループの実験結果とよく一致する。